

This Page Is Inserted by IFW Operations  
and is not a part of the Official Record

## **BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning documents *will not* correct images,  
please do not report the images to the  
Image Problem Mailbox.**

**This Page Blank (uspto)**

## PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 2000-232099

(43)Date of publication of application : 22.08.2000

J1017 U.S. PTO  
09/812365  
03/20/01

(51)Int.Cl.

H01L 21/31

(21)Application number : 11-031248

(71)Applicant : NEC CORP

(22)Date of filing : 09.02.1999

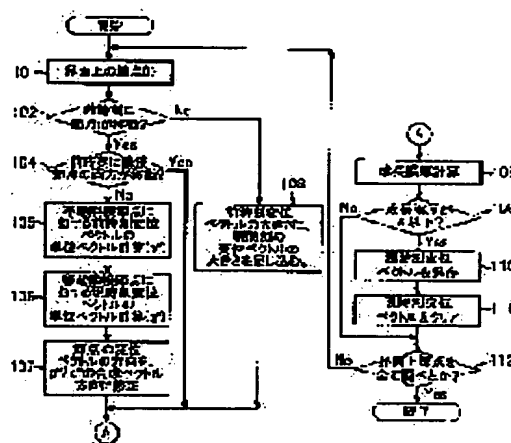
(72)Inventor : AKIYAMA YUTAKA

## (54) PROCESS SIMULATION METHOD

## (57)Abstract:

**PROBLEM TO BE SOLVED:** To realize reduction in fluctuations at the interface.

**SOLUTION:** Displacement vectors at respective nodes on the interface are calculated, based on oxidant concentration at prescribed time intervals, and a new interface is generated based on the shift vectors. At this time, it is determined whether or not the node to be calculated moved at previous time (step 102). When the node to be calculated has moved, it is determined whether or not the nodes on both sides have moved the previous time (step 104). When one of the nodes adjacent to the node to be calculated did not moved, the unit vector direction of the displacement vector at the previous time of the node which did not moved, and the unit vector direction of the displacement vector at the present time of the node moved adjacent to the node to be calculated are combined. Then, this combined vector direction is used as the displacement vector direction of the node to be calculated.



## LEGAL STATUS

[Date of request for examination] 24.03.1999

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number] 3123533

[Date of registration] 27.10.2000

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2000 Japanese Patent Office

**This Page Blank (uspto)**

**This Page Blank (uspto)**

**This Page Blank (uspto)**

**This Page Blank (uspto)**

(2)

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2000-232099

(P2000-232099A)

(43) 公開日 平成12年8月22日 (2000.8.22)

(51) Int.Cl.

H 0 1 L 21/31

識別記号

F I

H 0 1 L 21/31

ターム(参考)

5 F 0 4 5

審査請求 有 請求項の数 4 O L (全 12 頁)

(21) 出願番号 特願平11-31248

(22) 出願日 平成11年2月9日 (1999.2.9)

(71) 出願人 000004237

日本電気株式会社

東京都港区芝五丁目7番1号

(72) 発明者 秋山 豊

東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内

(74) 代理人 100071526

弁理士 平田 忠雄

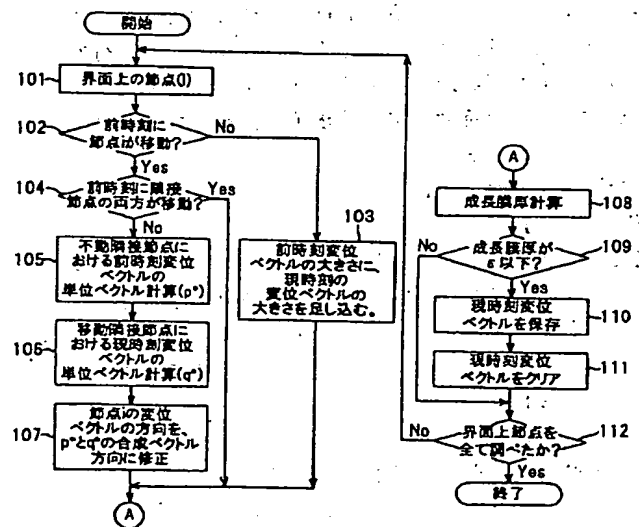
Fターム(参考) 5F045 AA20 AB32 AC11 GB07

(54) 【発明の名称】 プロセスシミュレーション方法

(57) 【要約】

【課題】 界面の変動を小さくできるようにしたプロセスシミュレーション方法を提供する。

【解決手段】 シリコン基板と酸化層の界面におけるオキシダント濃度に基づいて前記界面上の各節点の変位ベクトルを所定の時間刻みで計算し、この変位ベクトルに基づいて新界面を作成するに際し、対象の節点が前時刻に移動したか否かを判定し (ステップ102)、移動有りのときに該計算対象の節点の両側の節点が前時刻に移動しているか否かを判定する (ステップ104)。前記計算対象の節点に隣接する節点の一方が移動しなかった場合、不動側の節点の前時刻の変位ベクトルの単位ベクトル方向と前記計算対象の節点に隣接する移動した節点の現時刻の変位ベクトルの単位ベクトル方向とを合成し、この合成ベクトルの方向を前記計算対象の節点の変位ベクトルの方向とする。



## 【特許請求の範囲】

【請求項1】 半導体基板と酸化膜層の界面におけるオキシダント濃度に基づいて前記界面上の各節点の変位ベクトルを所定の時間刻みで計算して半導体装置を模倣的に製造するプロセスシミュレーション方法において、前時刻におけるオキシダント濃度の計算時に移動した移動節点の両側で隣接する2つの隣接節点が前記前時刻に移動したか否かを判定し、

前記2つの隣接節点の一方が移動して他方が移動しなかったとき、他方の隣接節点の前時刻の変位ベクトルの単位ベクトルと一方の隣接節点の現時刻の変位ベクトルの単位ベクトルを合成した合成ベクトルに基づいて前記移動節点の変位ベクトルの方向を修正し、前記移動節点の修正された変位ベクトルに基づいて前記移動節点上の前記酸化層の膜厚を計算することを特徴とするプロセスシミュレーション方法。

【請求項2】 前記酸化膜層の膜厚を計算するステップは、計算によって得られた膜厚が予め定めた膜厚より小なるとき、新たな界面の変形計算を行わないで前記移動節点の前時刻の変位ベクトルの大きさに現時刻の変位ベクトルの大きさを加算して前記移動節点の変位ベクトルとするステップを含むことを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

【請求項3】 前記移動節点の変位ベクトルを修正するステップは、前記一方及び他方の隣接節点を結ぶ2つの線分によって形成される角の二等分角方向に前記移動節点の変位ベクトルを設定するステップを含むことを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

【請求項4】 前記移動節点の変位ベクトルを修正するステップは、前記一方及び他方の隣接節点を結ぶ2つの線分によって形成される角を前記2つの線分によって形成される角を前記2つの線分の長さの比によって分割した方向に前記移動節点の変位ベクトルを設定するステップを含むことを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

## 【発明の詳細な説明】

## 【0001】

【発明の属する技術分野】 本発明は、プロセスシミュレーション方法に関し、特に、半導体装置の酸化等のプロセスにおけるシミュレーションをコンピュータを用いて行うためのプロセスシミュレーション方法に関する。

## 【0002】

【従来の技術】 プロセスシミュレータは、半導体装置における酸化プロセス、拡散プロセス、イオン注入プロセス等をコンピュータを用いた計算によって実際の作業のように模擬試作を行い、半導体素子の不純物プロファイル等の内部物理量や形状を予測するものである。プロセスシミュレータを用いて、半導体素子が最高の電気特性を発揮するように最適化を行えば、実際にLSIを試作するのに比べて、費用、期間共に大幅に短縮させること

ができる。プロセスシミュレータでは、各種半導体素子の製造工程をコンピュータを用いて計算するため、それぞれのプロセス毎にモデル式が組み込まれている。LSI内においては、素子同士が電気的に影響を及ぼさぬように、LOCOS (Local Oxidation of Silicon: 選択酸化法)、トレンチ等によって素子分離が行われる。

【0003】 近年の半導体素子の微細化に伴って、LOCOS、トレンチ等の素子分離についてのシミュレーションも必要になっている。このため、プロセスシミュレーションの2次元化が進められている。2次元LOCOS酸化の計算方法については、例えば、「半導体プロセスデバイスシミュレーション技術」(リアライズ社刊) pp79~89に記載がある。ここに記載の方法は、酸化速度はオキシダント濃度から計算し、或る時間間隔で $Si/SiO_2$ 界面がどの位移動するかを算出し、その変位量から形状の変化を計算している。

【0004】 ところで、低温で酸化速度が小さく、また、精度を保証するため、時間刻み(シミュレーション間隔)を細かくした場合、酸化膜成長は非常に小さくなる。更に、LOCOS酸化の場合、酸化雰囲気から導入されたオキシダント(oxidant)は、酸化膜中を拡散してシリコン表面に達するが、窒化膜下付近ではオキシダント濃度が小さく、酸化膜成長は非常に小さい。しかしながら、上述の文献に記載された方法では、酸化膜成長が非常に小さい場合でも、常に酸化膜の成長を計算して新界面(シリコン酸化膜境界)を作成しているため、常に不要な酸化計算を行っていることになる。

【0005】 本発明者らは、不要な酸化計算を行わないようにするプロセスシミュレーション方法として、特願平09-327616号公報を提案している。この方法は、不要な酸化計算を省くため、時間間隔 $\Delta t$ での酸化膜厚増加量 $\Delta T_{ox}$ がある値以下の場合には、オキシダント濃度を保存し、次時刻でそのオキシダント濃度を算入する。そして、次時刻において、前時刻の酸化膜厚増分量を考慮した酸化計算を行っている。

【0006】 図5は不要な酸化計算を省いた従来のプロセスシミュレーション方法の処理を示す。まず、 $t=0$ で初期化(ステップ501)した後、酸化計算を $\Delta t$ 毎( $t=t+\Delta t$ )に実施し(ステップ502)、オキシダント拡散方程式を解いて表面オキシダント濃度を求める(ステップ503)。ついで、ステップ503で求めたオキシダント濃度によって成長する酸化膜厚に応じて、オキシダント濃度を再設定する(ステップ504)。さらに、ステップ504で得られたオキシダント濃度を用いて変位ベクトルを計算し(ステップ505)、変位ベクトルから新界面を作成し(ステップ506)、ついで変形計算を行う(ステップ507)。以上の手順を所望の時刻になるまで( $t=end$ )、繰り返し実行する(ステップ508)。

【0007】 図6は図5のステップ504のオキシダント



3

ト濃度の再設定方法の詳細を示す。まず、被酸化界面上のそれぞれの節点に着目し（ステップ601）、前時刻 $t_0$ におけるオキシダント濃度と現時刻 $t_1$ におけるオキシダント濃度を足し合わせ、現時刻 $t_1$ のオキシダント濃度とする（ステップ602）。ついで、ステップ602で計算した現時刻のオキシダント濃度に基づいて、成長酸化膜厚を計算する（ステップ603）。さらに、成長酸化膜厚が比較値 $\epsilon$ 以下であるか否かを判定する

（ステップ604）。判定の結果、 $\epsilon$ 以下であれば現時刻 $t_1$ のオキシダント濃度を保存する（ステップ605）。ステップ605では、次回にステップ602の処理で用いるために、オキシダント濃度を計算用のレジスタ等から保存用のメモリ領域に保存（コピー）する。この後、計算用のレジスタ等における現時刻 $t_1$ のオキシダント濃度をクリアする（ステップ606）。ステップ604で $\epsilon$ 以上が判定された場合、処理はステップ607へ移行する。ステップ606の処理が終了後、ステップ601～607の処理を全ての被酸化界面上の節点に対して実行する（ステップ607）。図6の処理が終われば、図5のステップ505に戻って以降の処理を実行する。図6の処理により、不要な酸化計算を省くことができる。

【0008】図7は、LOCOS工程を経た半導体装置を示す。シリコン基板1の表面には酸化膜（ $\text{SiO}_2$ ）2が形成され、この酸化膜2の一部に窒化膜（ $\text{Si}_3\text{N}_4$ ）3が形成されている。図7で、酸化膜2が厚くなっている右半分は窒化膜3を取り除いた後、この部分に選択的に酸化を施し（LOCOS処理）、酸化膜を成長させた部分である。また、中央部は、酸化剤が窒化膜3の下部に拡散して進入したため、窒化膜3が上方向に湾曲している。

【0009】図8は図7の半導体装置のLOCOS形状の一部を拡大した二次元シュミレーションを示している。時刻 $t=t_1$ のときの変位ベクトルの方向は、節点の鉛直方向になるようにしている。図5、図6に示した従来方法では、前時刻 $t=t_0$ の節点移動量をオキシダント濃度として保持しているため、前時刻の節点の移動方向の情報を保持していない。このため、前時刻 $t=t_0$ の移動方向が考慮されないため、界面の変動（がたつき）が大きくなる。

【0010】図9は界面の変動を低減すべく、先に本発明者らにより提案された他のプロセスシミュレーション方法を示す。まず、酸化時間をゼロにセットする（ステップ901）。ついで、酸化時刻を $\Delta t$ 毎に更新（ $t=\Delta t$ ）する（ステップ902）。酸化計算のそれぞれの時刻において、

$$D_{ox} \nabla \cdot \nabla C_{ox} = 0$$

（ $D_{ox}$ はオキシダント拡散係数、 $C_{ox}$ は表面オキシダント濃度）のオキシダント拡散方程式を用いてオキシダント濃度を解き、表面オキシダント濃度 $C_{ox}$ を求める（ス

4

テップ903）。次に、変位ベクトル $V_0$ を計算する（ステップ904）。変位ベクトル $V_0$ の大きさは、次の式により計算する。

$$[0011] \quad |V_0| = \Delta T_{ox} / \Delta t = K \cdot C_{ox}$$

（ただし、 $\Delta T_{ox}$ は $\Delta t$ で増加する酸化膜厚、 $K$ は比例定数）

また、変位ベクトルの方向は、節点の鉛直方向とする。さらに、変位ベクトルによって成長する酸化膜厚に応じて、変位ベクトルを再設定する（ステップ905）。ついで、ステップ905で得られた変位ベクトルを用いて新界面を作成する（ステップ906）。この後、変形計算を実行する（ステップ907）。以上の処理を所望の時刻（ $t = \text{end}$ ）になるまで、繰り返し実行する。

【0012】図10は図9に示したステップ905の変位ベクトルの再設定方法の詳細を示す。まず、被酸化界面上の或る節点を対象とする（ステップ1001）。そして、前時刻における変位ベクトル $V_0$ と現時刻の変位ベクトル $V_1$ のベクトル和を計算し、これを現時刻の変位ベクトル $V_1$ とする（ステップ1002）。ついで、変位ベクトル $V_1$ に基づいて成長酸化膜厚 $\Delta T_{ox}$ を計算する（ステップ1003）。さらに、成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下か否かを判定する（ステップ1004）。判定の結果、 $\epsilon > \Delta T_{ox}$ であれば、次の計算で用いるために、現時刻の変位ベクトルを計算用のレジスタ等から保存用のメモリ領域に保存（コピー）する（ステップ1005）。この後、計算用のレジスタ等における現時刻 $t_1$ の変位ベクトルをクリアする（ステップ1006）。また、 $\Delta T_{ox} > \epsilon$ であればステップ1007へ移行する。以後の処理は、図6と同じであり、ステップ1006で現時刻の変位ベクトルを計算用のメモリ領域からクリアした後、ステップ1007で界面上の節点の全てについて調べたか否かを判定し、未調査の節点が残っていればステップ1001へ戻って以降の処理を繰り返し実行し、全て調べ終わっていれば処理を終了する。

【0013】図11は図10の処理における二次元シュミレーションを示し、図7に示した半導体装置のLOCOS形状の一部を拡大して示している。酸化は、時刻 $t$ が $t_0 \rightarrow t_1 \rightarrow t_2 \dots$ と経過するにつれて進行する。まず、時刻 $t=t_0$ （前時刻）における変位ベクトル $V_0$ （大きさ： $\Delta T_{ox} / \Delta t$ 、方向は節点の鉛直方向）を計算する。変位ベクトル $V_0$ の大きさと酸化時間の加算値 $\Delta t$ の積をとり、その時刻における成長酸化膜厚 $\Delta T_{ox}$ を計算する。成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以上の節点に関しては、従来通り酸化計算を行う。成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下の節点では、その節点における変位ベクトル $V_0$ を保存し、その時刻の酸化計算を行わない。保存した変位ベクトル $V_0$ は、現時刻 $t_1$ 時の変位ベクトル $V_1$ とのベクトル和を取り、次時刻 $t_2$ の変位ベクトルにする。以上の手順を全ての被酸化界面上の節点に対して実行する。

5

【0014】図12は、図9のステップ905の変位ベクトルの再設定方法の他の例を示す。まず、被酸化界面上の或る節点を対象に選定する(ステップ1201)。そして、前時刻における変位ベクトルに現時刻の変位ベクトルの大きさ(スカラー量)を加算し、現時刻の変位ベクトルにする(ステップ1202)。この変位ベクトルから、成長酸化膜厚を計算する(ステップ1203)。ついで、成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下か否かを判定する(ステップ1204)。成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下であれば、現時刻における変位ベクトルを計算用のレジスタ等から保存用のメモリ領域に保存(コピー)する(ステップ1205)、変位ベクトルの再設定を行う。この後、計算用のレジスタ等に存在する現時刻における変位ベクトルをクリアする。

【0015】図13は、図12の処理に対応した二次元シュミレーションを示し、図7に示した半導体装置のLCCOS形状の一部を拡大して示している。まず、時刻 $t = t_0$ における変位ベクトル $V_0$ (大きさ: $\Delta T_{ox}/\Delta t$ 、方向は節点の鉛直方向)を計算する。変位ベクトル $V_0$ と酸化時間刻みの積を取り、その時刻における成長酸化膜厚を計算する。成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以上の節点については、上述した様にして酸化計算を行う。また、成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下の節点については、その節点における変位ベクトル $V_0$ を保存し、その時刻の酸化計算は行わない。保存した変位ベクトルは、現時刻( $t = t_1$ )時の変位ベクトルの大きさ $|V_1|$ 分だけ増加させ、現時刻の変位ベクトルにする。以上の手順を全ての被酸化界面上の節点に対して実行する。

【0016】

【発明が解決しようとする課題】しかし、従来のプロセスシュミレーション方法によると、図5、図6の第1の従来方法では、界面が円滑にならず、変動が大きくなるという欠点がある。また、図9、図10、図12に示した第2の従来方法によれば、上記第1の従来方法に比べて界面の変動(がたつき)を小さくできるが、 $t = t_1$ において節点の変位ベクトルの方向を節点に接続された線分の2等分角方向にしているため、変動を大幅に解消することはできない。

【0017】したがって、本発明の目的は、界面の変動を小さくできるようにしたプロセスシュミレーション方法を提供することにある。

【0018】

【課題を解決するための手段】本発明は、上記の目的を達成するため、半導体基板と酸化層の界面におけるオキシダント濃度に基づいて前記界面上の各節点の変位ベクトルを所定の時間刻みで計算して半導体装置を模擬的に製造するプロセスシュミレーション方法において、前時刻におけるオキシダント濃度の計算時に移動した移動節点の両側に隣接する2つの隣接節点が前記前時刻に移動したか否かを判定し、前記2つの隣接節点の一方が移動

6

して他方が移動しなかったとき、他方の隣接節点の前時刻の変位ベクトルの単位ベクトル(変位量が1のベクトル)と一方の隣接節点の現時刻の変位ベクトルの単位ベクトルを合成した合成ベクトルに基づいて前記移動節点の変位ベクトルの方向を修正し、前記移動節点の修正された変位ベクトルに基づいて前記移動節点上の前記酸化層の膜厚を計算することを特徴とするプロセスシュミレーション方法を提供する。

【0019】この方法によれば、シュミレーション時間が変化したときに移動が生じた節点に関して、この節点の両側に隣接する節点(隣接節点)の一方が移動しなかったとき、移動した節点は、前時刻で移動していない隣接の節点(不動隣接節点)の変位ベクトルの単位ベクトルの方向と、現時刻で移動した隣接の節点(移動隣接節点)の変位ベクトルの単位ベクトルの方向との合成ベクトルを求め、この合成ベクトルの方向へ変位ベクトルの方向を修正する。このように、前時刻における変位ベクトルの方向を考慮して、現時刻の変位ベクトルの方向を修正するため、界面の変動(がたつき)を低減することができる。

【0020】

【発明の実施の形態】以下、本発明の実施の形態を図面に基づいて説明する。

(第1の実施の形態)図1は本発明によるプロセスシュミレーション方法の第1の実施の形態を示す。まず、被酸化界面上の節点 $i$ を対象に選定する(ステップ101)。そして、酸化変形計算により、節点 $i$ が前時刻に移動したか否かを判断する(ステップ102)。前時刻に節点 $i$ が移動していない場合、前時刻変位ベクトルの大きさ(長さ)に現時刻の変位ベクトルの大きさ(長さ)を加算(ステップ103)した後、ステップ108へ移行する。

【0021】また、ステップ102において節点 $i$ の移動が判定された場合、次に、節点 $i$ に隣接した節点( $i-1$ ), ( $i+1$ )のいずれもが前時刻 $t_0$ に移動したか否かを判定する(ステップ104)。前時刻 $t_0$ に節点( $i-1$ ), ( $i+1$ )のいずれもが移動している場合には、処理をステップ108へ移行する。そして、節点( $i-1$ ), ( $i+1$ )の内一方のみが移動した場合(ステップ104)、移動しなかった隣接の節点における前時刻 $t_0$ の変位ベクトルの単位ベクトルを計算し(ステップ105)、移動した隣接の節点における現時刻 $t_1$ の変位ベクトルの単位ベクトルを計算する(ステップ106)。そして、ステップ105, 106で求めた単位ベクトルのベクトル和の方向に、節点 $i$ における変位ベクトルの方向を修正する(ステップ107)。次に、変位ベクトルの大きさに基づいて成長酸化膜厚を計算する(ステップ108)。ついで、成長酸化膜厚が比較値 $\epsilon$ 以下か否かを判定する(ステップ109)、成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下であれば、現時刻における変位ベクトル

7

ルを計算用のレジスタ等から保存用のメモリ領域に保存(コピー)する(ステップ110)。その後、現時刻の変位ベクトルを前記計算用のレジスタ等から削除する(ステップ111)。以上のステップを界面上の全ての設定について実行したか否かを判定(ステップ112)、全てについて実行していれば処理を終了し、未調査の節点があれば、処理をステップ101へ戻し、以降の処理を繰り返し実行する。

【0022】図2は図1の処理における二次元シュミレーションを示す。このシュミレーションは、図7の半導体装置のLOCOS形状の一部を拡大して示している。以下においては、節点*i*における変位を中心に説明する。まず、時刻 $t = t_0$ (前時刻)における変位ベクトル(大きさは $\Delta T_{ox} / \Delta t$ 、方向は節点の2等分角方向)を計算する。この変位ベクトルと酸化時間の加算値 $\Delta t$ の積をとり、その時刻における成長酸化膜厚を計算する。成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以上の節点(ここでは、節点*i*)に関しては、従来通りの酸化計算を実施する。また、成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下の節点(ここでは、節点(*i* - 1)、以下、不動節点という)では、その節点(*i* - 1)における変位ベクトルを保存し、その時刻の酸化計算は行わない。保存した変位ベクトルは、現時刻( $t = t_1$ )において、前時刻 $t_0$ の変位ベクトルの大きさに現時刻 $t_1$ の変位ベクトルの大きさを加算し、その節点における変位ベクトルとする。時刻 $t_0$ から $t_1$ への変化において移動した節点(*i*, *i* + 1, *i* + 2, ... )のうち、不動節点(*i* - 1)を隣接の節点に持つ節点*i*においては、不動節点(*i* - 1)の $t = t_1$ における変位ベクトルの単位ベクトル $p^*$ (→)の方向と、移動した隣接の節点(*i* + 1)の $t = t_1$ における変位ベクトルの単位ベクトル $q^*$ (→)の方向とのベクトル和の方向に、変位ベクトルの方向を修正する。

【0023】以上のように、第1の実施の形態においては、移動した節点(*i*, *i* + 1, *i* + 2, ... )のうち、隣接節点が移動しなかった節点*i*に関しては、不動節点の $t = t_0$ における変位ベクトルの単位ベクトル $p^*$ (→)の方向と、移動節点の $t = t_1$ に変位ベクトルの単位ベクトル $q^*$ (→)の方向とのベクトル和の方向に変位ベクトルの方向を修正している。これにより、シュミレーションによる界面形状の変動(がたつき)を低減することができる。

【0024】(第2の実施の形態)図3は本発明によるプロセスシュミレーション方法の第2の実施の形態を示す。本実施の形態では、上記した第1の実施の形態のステップ106と107の間に、移動隣接節点における現時刻の変位ベクトルの単位ベクトルを補正する処理(ステップ307)を追加し、移動節点の $t = t_1$ に変位ベクトルの単位ベクトル $q^*$ 方向の補正を行っている。以下においては、節点*i*に注目して変位を説明する。

【0025】被酸化界面上の節点*i*を計算対象にしたと

8

き(ステップ301)、節点*i*が前時刻に移動したか否かを酸化の変形計算により判断する(ステップ302)。前時刻に節点*i*が移動していない場合、ステップ303へ移行して前時刻 $t_0$ の変位ベクトルの大きさに現時刻 $t_1$ の変位ベクトルの大きさを加算した後、ステップ308へ移行する。また、ステップ302で節点*i*が移動していた場合、節点*i*に隣接した節点(*i* - 1, *i* + 1)のいずれかが前時刻に移動したか否かを判定する(ステップ304)。ステップ304で隣接の両方の節点(*i* - 1, *i* + 1)の移動が判定された場合には、ステップ309へ処理を移行する。そして、隣接の節点の一方(ここでは、*i* - 1)が移動しなかった場合、この不動隣接節点(*i* - 1)における前時刻の変位ベクトルの単位ベクトルを計算し(ステップ305)、移動隣接節点における現時刻の変位ベクトルの単位ベクトル $q^*$ を計算する(ステップ306)。さらに、移動隣接節点における現時刻の変位ベクトルの単位ベクトル $q^*$ を補正する(ステップ307)。

【0026】ステップ308では、ステップ305、307で求めた単位ベクトル $p^*$ と $q^*$ のベクトル和方向に、節点*i*における変位ベクトルの方向を修正する。この修正された変位ベクトルの大きさから、成長酸化膜厚を計算する(ステップ309)。さらに、成長酸化膜厚が比較値 $\epsilon$ 以下か否かを判定する(ステップ310)。成長酸化膜厚が $\epsilon$ 以下であれば、現時刻 $t_1$ における変位ベクトルを計算用のレジスタ等から保存用のメモリ領域に保存(コピー)する(ステップ311)。その後、現時刻の変位ベクトルを前記計算用のレジスタ等から削除する(ステップ312)。以上の一連の処理を界面上の全てについて実行し(ステップ313)、未処理の節点があればステップ301に戻って以降の処理を繰り返し実行する。この後、図5に示したステップ505以降の処理を実行し、新界面を作成する。

【0027】図4は図3の処理における二次元シュミレーションを示し、具体的には、ステップ307における現時刻の変位ベクトルの単位ベクトルの補正を示している。第1の実施の形態においては、節点*i*の $t = t_1$ における変位ベクトルの単位ベクトルの方向は、節点の2等分角方向としていた。これに対し、第2の実施の形態では、節点の2等分角方向ではなく、節点*i*の両側に接続されている線分*m*と*n*の長さの比( $m : n$ )の方向に単位ベクトルの方向が向くようにしている。

【0028】

【発明の効果】以上説明した通り、本発明のプロセスシュミレーション方法によれば、変位の計算対象の節点の両側に位置する節点の一方が移動しなかったとき、この移動しなかった節点に隣接する移動した節点については、前記移動しなかった節点の前時刻の変位ベクトルの単位ベクトル方向と、移動した隣接の節点の現時刻の変位ベクトルの単位ベクトル方向を合成したベクトル方向

に変位ベクトルの方向を設定するようにしたので、シミュレーションによる界面形状の変動（がたつき）を低減できる。また、不要な計算を省くことができるため、計算時間を短縮することができる。

【0029】また、移動しなかった節点と移動した節点の間の節点の両側の線分の比に応じて合成ベクトルの方向を修正することにより、さらにシミュレーションによる界面形状の変動を低減することができる。

#### 【図面の簡単な説明】

【図1】本発明によるプロセスシミュレーション方法の第1の実施の形態を示すフローチャートである。

【図2】図1の処理における二次元シュミレーションを示す説明図である。

【図3】本発明によるプロセスシミュレーション方法の第2の実施の形態を示すフローチャートである。

【図4】図3の処理における二次元シュミレーションを示す説明図である。

【図5】不要な酸化計算を省いた従来のプロセスシミュレーション方法の処理を示すフローチャートである。

【図6】図5のオキシダント濃度の再設定方法の詳細を

示すフローチャートである。

【図7】LOCOS工程を経た半導体装置を示す断面図である。

【図8】図7の半導体装置のLOCOS形状の一部を拡大した二次元シュミレーションを示す説明図である。

【図9】界面の変動を低減するための従来のプロセスシミュレーション方法を示すフローチャートである。

【図10】図9における変位ベクトルの再設定方法の詳細を示すフローチャートである。

【図11】図10の処理における二次元シュミレーションを示す説明図である。

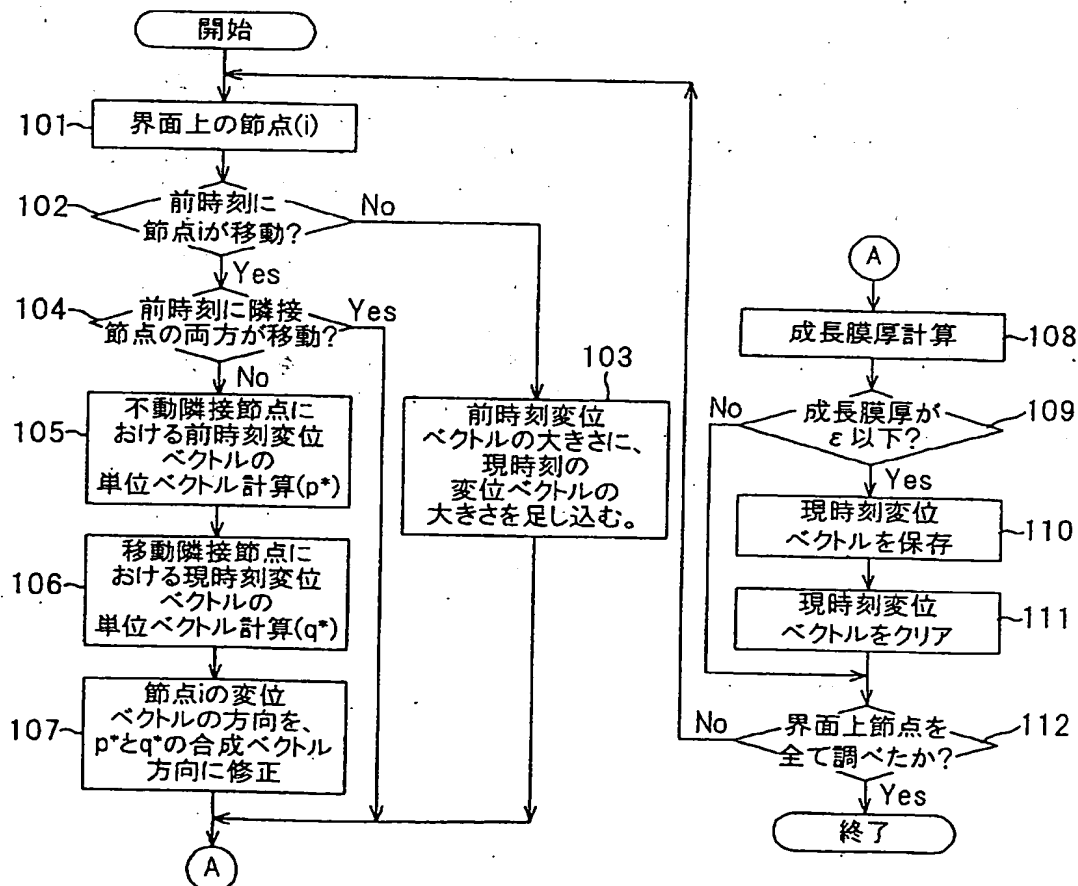
【図12】図9の変位ベクトルの再設定方法の他の例を示すフローチャートである。

【図13】図12の処理に対応した二次元シュミレーションを示す説明図である。

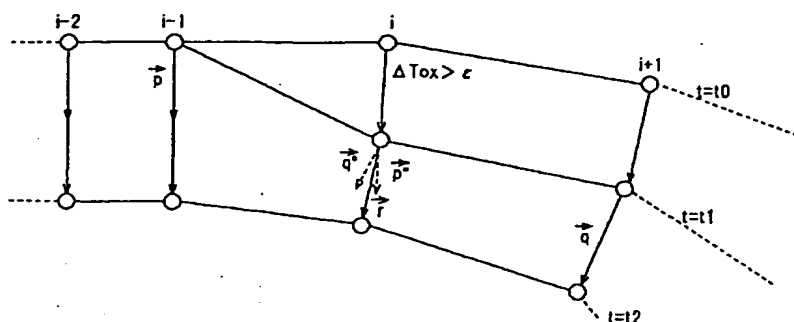
#### 【符号の説明】

- 1 シリコン基板
- 2 酸化膜 ( $\text{SiO}_2$ )
- 3 窒化膜 ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ )

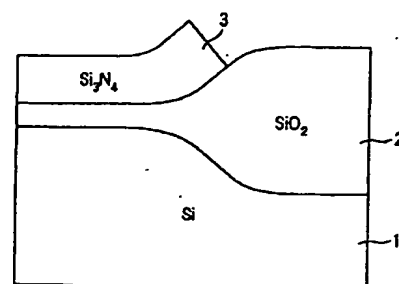
【図1】



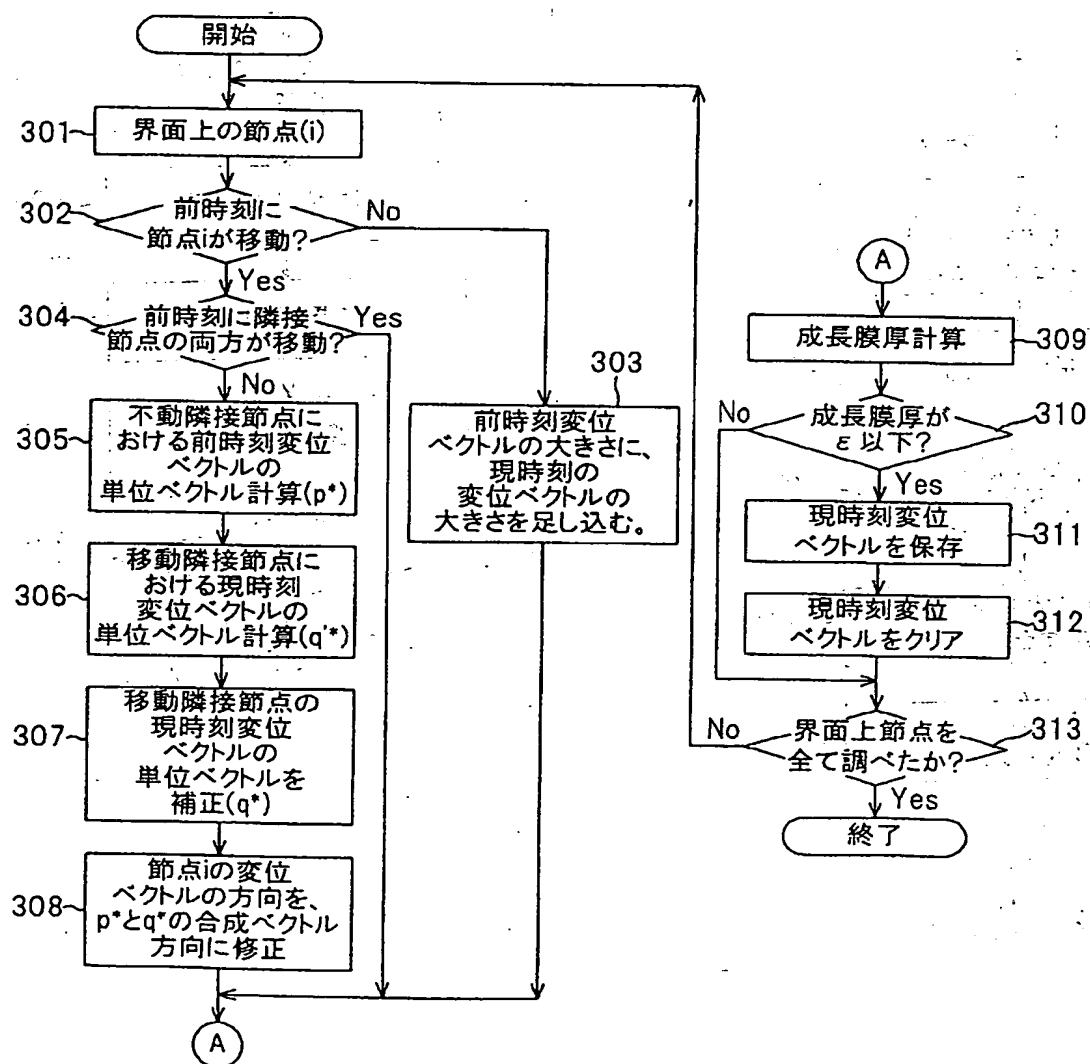
【図2】



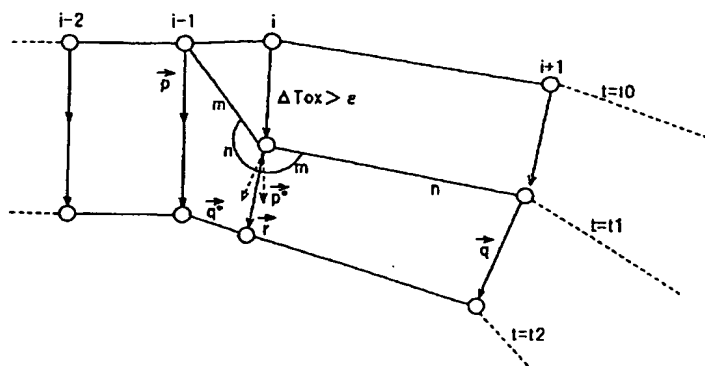
【図7】



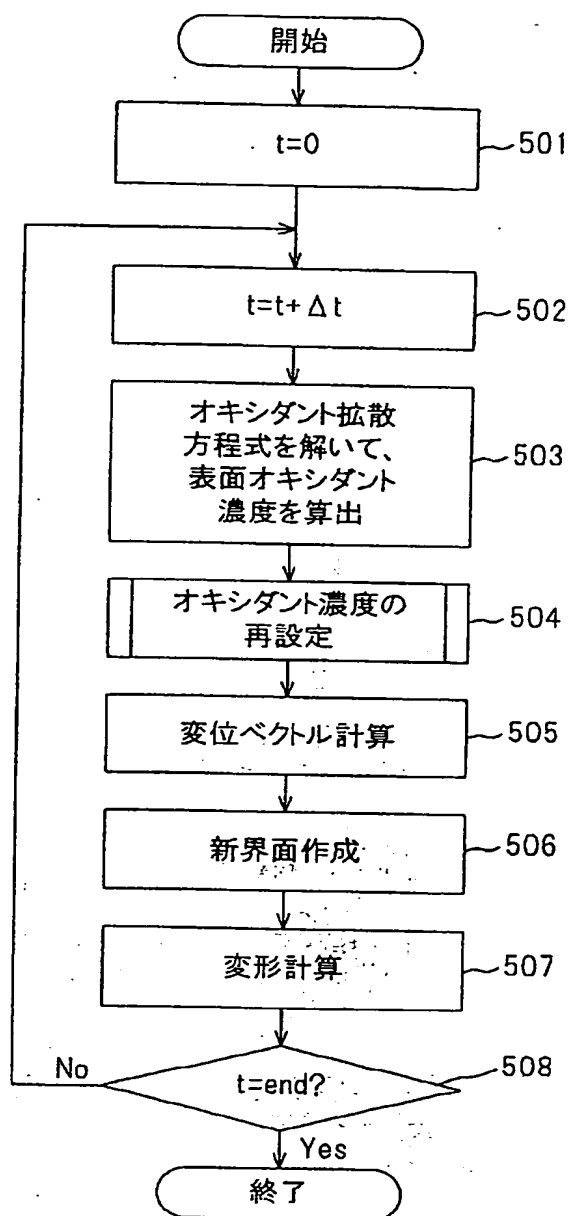
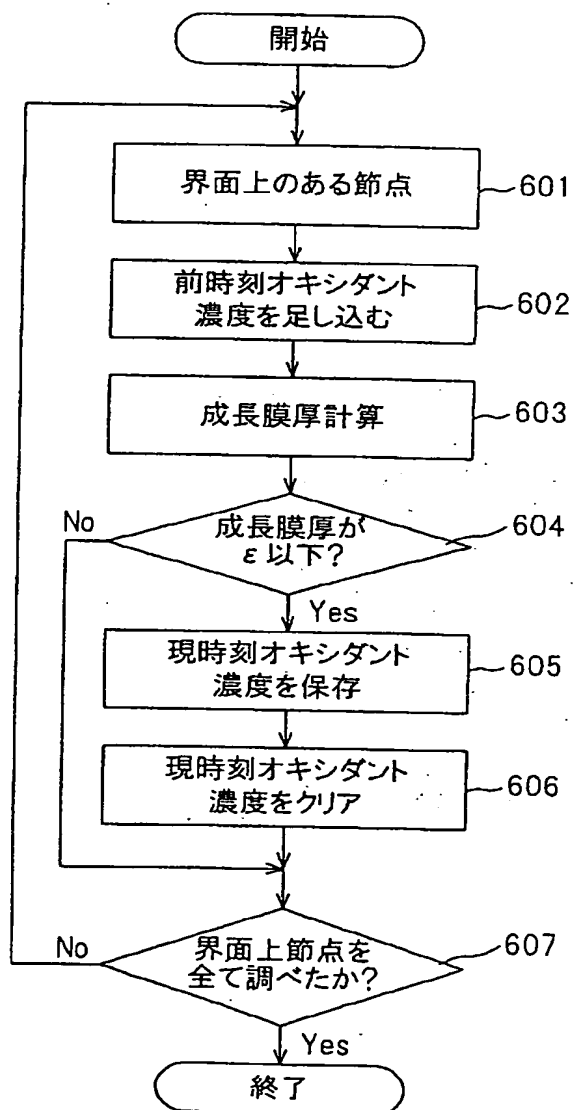
【図3】



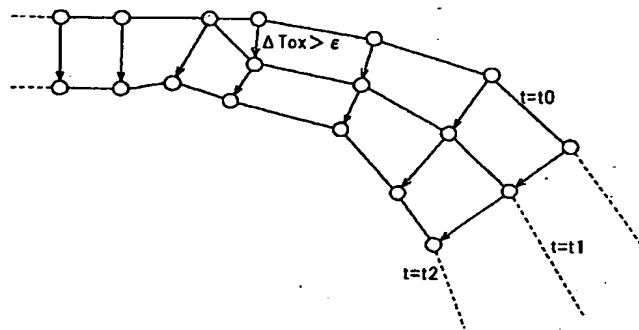
【図 5】



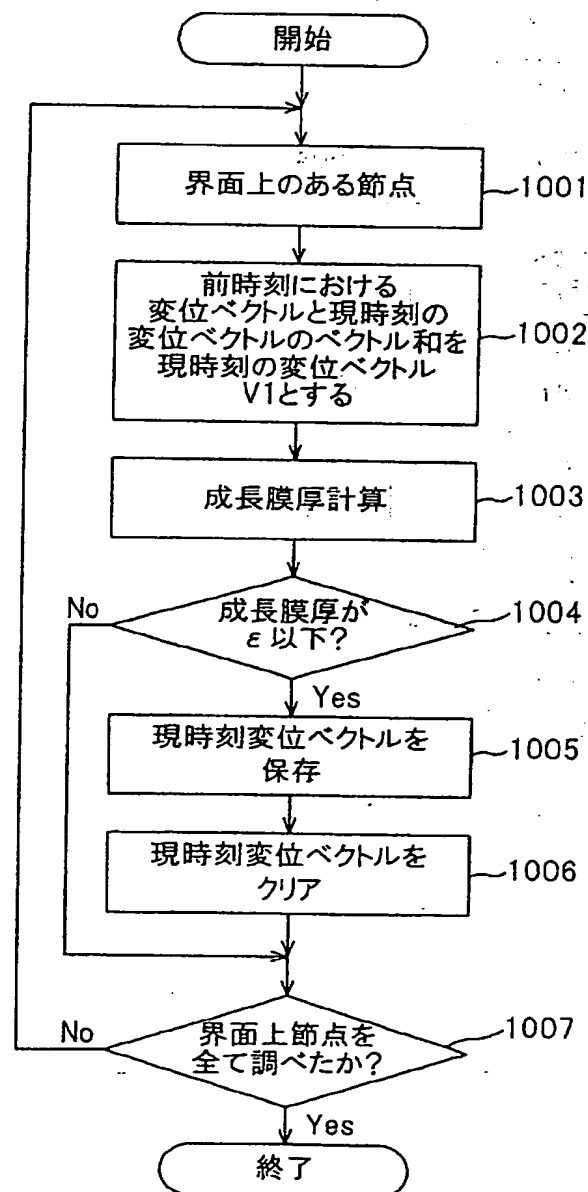
【图 6】



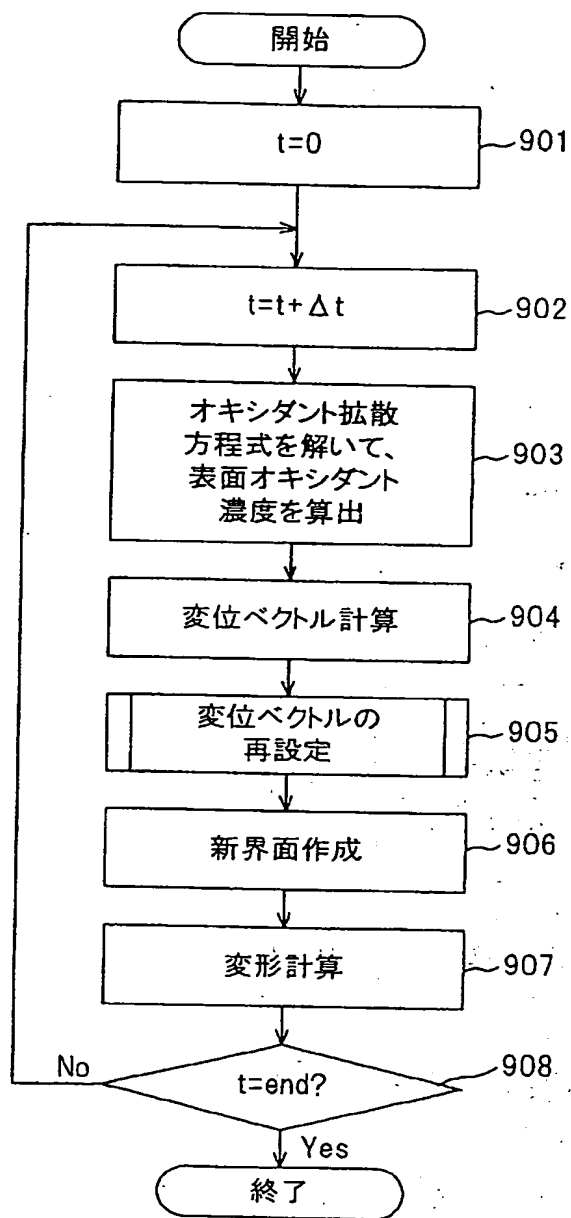
【図 8】



【図 10】

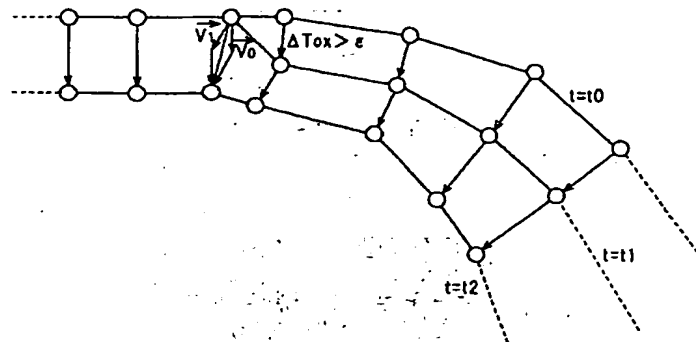


【図9】

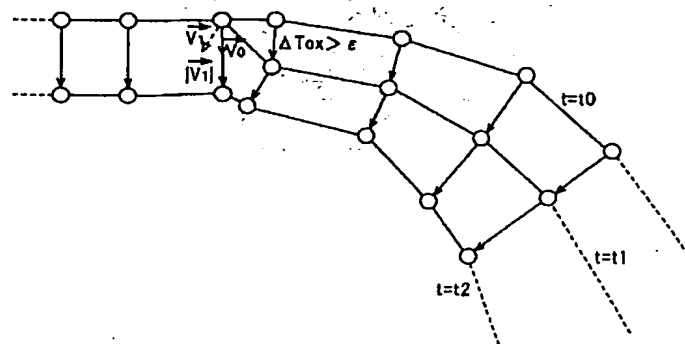




【図11】



【図13】



【図12】

